chinaXiv:202211.00126v1

多元时间序列上基于深度学习的动态格兰杰因果分析*

刘博[1,2]　　洪申达[3]　　李红燕[1,2]

[1]（北京大学智能学院 北京 100871）

[2]（机器感知与智能教育部重点实验室（北京大学） 北京 100871）

[3]（北京大学健康医疗大数据国家研究院 北京 100871）

摘要：复杂动力系统研究中的一个重要内容是发现以多元时间序列形式存在的各组成部分间的相互作用关系。因果关系相比于相关关系对系统的本质机制进行了更深入的探索，并以超越简单相关性分析的方式在对复杂动力系统的研究中发挥巨大作用。格兰杰因果关系分析提供了一种强大的时间序列结构发现框架，自提出后被各领域广泛应用，具有重要的研究意义和现实价值。但在诸如人体生理系统这样高度复杂的非线性动力系统中，其因果关系建立在多元、非线性、动态的时间序列上，这对于传统格兰杰因果关系分析方法是很大挑战。为此，本文提出一种基于深度学习的动态格兰杰因果关系分析方法 DNNGC，来发现复杂、动态、非线性的多元时间序列间的格兰杰因果关系。DNNGC 利用深度学习对复杂非线性关系的建模能力来充分拟合多元时序数据间的非线性关系，通过在原格兰杰因果关系的基础上添加存在时间段实现了动态因果分析，并改进其预测结构使模型空间复杂度从 O(n2)降为 O(n)，以便对现实系统中大规模时间序列上的分析具有更好的可行性。此外，本文还设计了适应格兰杰因果关系的神经网络架构，并在三种典型的格兰杰因果关系存在形式下，对 DNNGC 的实验结果进行了详细讨论。最后本文将 DNNGC 应用在人体睡眠期间各生理系统间的分析中，发现了人体潜在的、动态的格兰杰因果关系状况，具有很好的现实意义。

关键词：深度学习　因果推断　信息流　多元时间序列　动态格兰杰因果关系

分类号：TP391

Dynamic granger causality analysis of multivariate time series based on deep learning

Liu Bo[1,2]　Hong Shenda[3]　Li Honyan[1,2]

[1](School of Intelligence Science and Technology, Peking University, Beijing 100871, China)

[2] (Key Laboratory of Machine Perception (Peking University), Ministry of Education, Beijing 100871, China)

[3] (National Institute of Health Data Science, Peking University, Beijing 100871, China)

Abstract: A significant issue in the study of complex dynamical systems is to discover the interaction between the components stored in the form of multivariate time series. Compared with the correlation, causality further explores the essential mechanism of the system, and plays a great role in the study of complex dynamic systems in a way beyond simple correlation analysis. Granger causality analysis

* 本文系国家重点研发计划项目（项目编号：2021YFE0205300）、国家自然科学基金项目（项目编号：62172018,62102008）的研究成果之一。

provides a powerful time series structure discovery framework, which has been widely used in various fields since proposed, with important research significance and practical value. However, in highly complex nonlinear dynamical systems such as the human physiological system, where causality is based on the time series of multivariation, nonlinearity and dynamics, it' s a huge challenge to the traditional granger causality analysis method. In order to solve this problem, a deep learning-based dynamic granger causality analysis method DNNGC is proposed, to discover the granger causality among complex, dynamic and nonlinear multivariate time series. DNNGC utilizes the modeling ability of deep learning to fully fit the nonlinear relationships between multivariate time series data. By adding existence time periods to the original granger causality, DNNGC realizes dynamic causal analysis. It' s improving granger causality' s prediction structure that enables DNNGC to reduce the model space complexity from O(n2) to O(n), making it more feasible for the analysis of large-scale time series in real-world systems. In addition, a deep neural network architecture adapted to granger causality is designed. The experimental results of DNNGC are discussed in detail under three typical forms of granger causality. Finally, applying DNNGC to the analysis of human inter-physiological systems during sleep to discover potential and dynamic granger causality in the human body has good practical significance.
Keywords: deep learning causality inference information flow multivariate time series dynamic granger causality

chinaXiv:202211.00126v1

1 引言

复杂动力系统中各组分的活动通常以多元时间序列的形式记录和存储，这些序列实际上反映了系统的运行过程[1]，研究其中动态变化的相互作用关系可以发现和理解系统的运行机制和潜在结构。例如脑电图(electroencephalogram, EEG)记录并反映了大脑神经元的活动，已有研究从脑电图中发现信息流动与大脑内在网络结构有关[2]，通过从多元时间序列中使用各种相互作用关系分析方法研究大脑功能网络结构能更好地理解大脑如何执行特定的功能[3-4]。

当仅使用简单的相关或不相关性来表述多元时间序列间的相互作用时，由于相关性对方向识别的内在缺陷以及共同驱动变量的影响[3]，间接相互作用的变量可能会被判断为直接相关，容易造成复杂系统内相关信息的冗余或虚假。而因果关系[5-6]则对相互作用关系进一步解释了“谁导致了谁”，表述了变量间的信息流向，更能发现系统本质机制，并以超越简单相关性分析的方式在对复杂动力系统的研究中发挥巨大作用[6]。例如人体各生理系统持续交互产生了大量多元时间序列，图 1(a)表示由人体 4 个部位产生的电信号组成的多元时间序列，(b)和(c)分别表示给定时间段内人体睡眠期间多元时间序列上的相关性分析和动态因果关系分析结果。其中蓝线表示系统本质：眼动(electrooculogram, EOG)导致了心率(electrocardiogram, ECG)和下巴肌肉张力(chin electromyography, CHIN EMG)、心率(ECG)导致了大脑活动(EEG)，但相关性分析则发现所有变量都是相关的，虚假的作用关系如(c)中灰线所表示，这就导致信息的错误。

对于人体这种高度复杂的多元非线性系统而言，各部位的因果关系又是随时间动态变化的，比如生理学家已发现在深睡期间主要是脑部系统的交互而浅睡期

chinaXiv:202211.00126v1

间则全身系统的交互增多[7]。如图 1 所示，动态变化体现在某些部位的因果关系过一段时间就消失或出现，可能出现图 1(c)中随时间变化的因果关系。如果能从这些多元时间序列中分析出系统随时间动态变化的格兰杰因果关系，更有助于理解系统的本质机制。由于任何一个变量对应的系统出现故障都可能导致整个人体的发病，如果能够通过分析而知晓人体各部位的动态因果关系，则当某个变量在某个时间点出现问题时，就能迅速将潜在原因限制在该时间段对故障变量有因果关系的变量中，以便尽快找到事故原因，节省医疗救治中宝贵的时间。

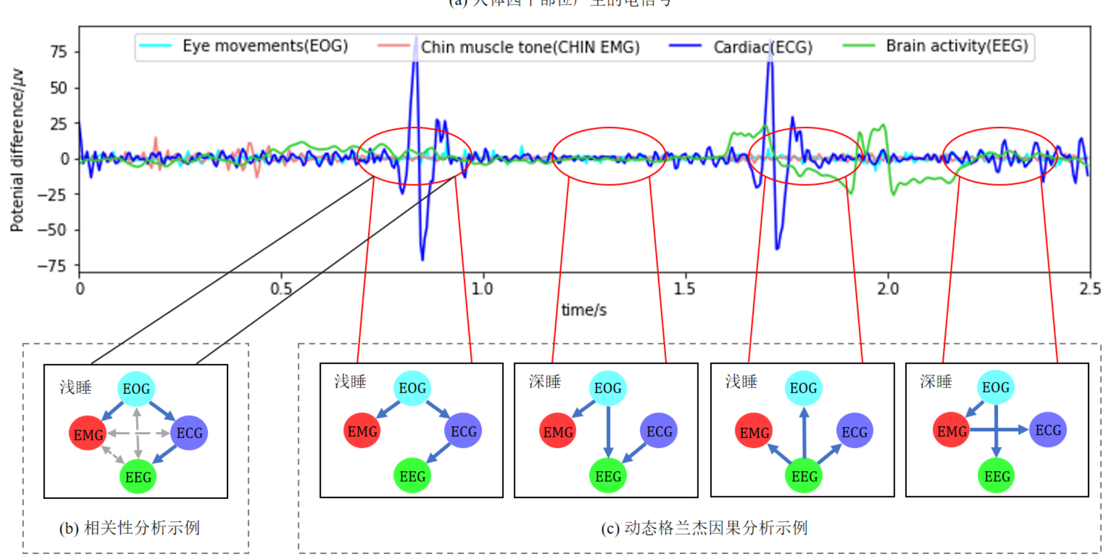


图 1 人体睡眠期间多元时间序列间的动态因果关系和相关性分析示例

格兰杰因果关系(granger causality, GC)[8]提供了一种强大的时间序列结构发现框架，它量化了一个时间序列的过去有助于预测另一个时间序列的未来演变的程度，从预测的角度定义了“因果关系”。格兰杰因果关系自提出后被广泛应用于经济[9]、金融[10]等领域，目前正逐渐流行于神经科学的研究中[11]，典型的应用是将格兰杰因果关系作为从多元时间序列中分析大脑内有效连接(effective connectivity)[12]的一种主要方法，研究一个神经系统如何影响另一个神经系统[13-14]。

但是将传统格兰杰因果关系应用在复杂系统多元时间序列上的因果分析时也存在以下挑战：(1)传统格兰杰因果关系只分析两个变量而忽略系统中其它序列的影响；(2)需要较强的先验知识来假设变量间的关系是线性的，难以分析多元时间序列间复杂的非线性关系；(3) 静态地分析整个时序上的因果，无法捕捉复杂系统中潜在、动态的因果关系。

深度神经网络能够表示输入和输出之间复杂的非线性相互作用，长短期记忆网络(long short-term memory, LSTM)[15-17]在预测多元时间序列方面表现出令人印象深刻的性能[18]，而预测又对于确定变量间格兰杰因果关系至关重要；同时深度神经网络作为一种数据驱动的非参数方法，可以在不需要任何先验知识的情况下训练得到具有良好效果的模型，非常适合建模复杂未知系统中多元时间序列间的复杂非线性关系[19-20]。

2 相关工作

格兰杰因果关系可以追溯到 Wiener 提出的因果关系的统计学概念[21]：如果知道时间序列 Y 的过去可以改善对 X 的预测（与单独使用 X 的过去相比），Y 会

导致 X。诺贝尔经济学奖获得者 Granger[8]在随机过程的线性向量自回归模型(vector autoregressive model, VAR)的背景下正式提出用于时间序列的因果关系概念：如果使用所有可用信息$\mathcal{U}_t$($\mathcal{U}_t$代表 t-1 时刻(含)以前所有相关变量的历史信息)，能够比使用除 $\boldsymbol{Y}_t$ 之外的信息$(\mathcal{U}-\boldsymbol{Y})_t$更好地预测 $\boldsymbol{X}_t$，并经过统计检验证明结果显著性，则 $\boldsymbol{Y}_t$ 导致了 $\boldsymbol{X}_t$，即现在通常被称为的格兰杰因果关系。简单地来说如果仅使用 $\boldsymbol{X}_t$ 的历史信息预测 $\boldsymbol{X}_t$ 的预测效果在引入 $\boldsymbol{Y}_t$ 的历史信息后得到提升，意味着有信息从 $\boldsymbol{Y}_t$ 流向 $\boldsymbol{X}_t$，则称 $\boldsymbol{Y}_t$ 对 $\boldsymbol{X}_t$ 有格兰杰因果关系。

传统格兰杰因果关系突出的问题：(1)需要很强的先验知识去预定义模型是 VAR；(2)建模函数为线性函数，难以分析非线性关系；(3)仅考虑二元间的因果关系，没有考虑任何潜在的混杂因素，难以正确分析复杂系统中多元间的因果关系；(4) 静态地分析整个时序数据上的因果。

研究人员针对以上传统格兰杰因果关系的缺点提出了大量改进模型[22]。条件 GC 分析则是在(1)(2)的基础上引入条件变量[23]，有效地区分变量间的直接因果和间接因果。并提出带有惩罚项的模型，比如 lasso[24]、group-lasso[25]等，以解决稀疏回归问题，将格兰杰因果关系推广至高维系统。非线性 GC 分析则是将(1)(2)中的线性函数改进为非线性函数，关键在于核函数的选择，比如基于径向基函数(radial basis functions, RBF)[26]、基于再生核 Hilbert 空间(reproducing kernel hilbert spaces, RKHS)[27]等，用于解决非线性系统的因果问题。但这些改进的方法仍然存在不足：（1）需要一定的先验知识来预先定义模型的类型，而通常对于一个未知系统，其本质的过程又是难以提前知晓的；（2）难以设计足够复杂的函数模型，去拟合高度复杂动力系统的非线性机制。

而采用神经网络的格兰杰因果关系分析方法目前只有初步的探索，Attanasio 等[28]和 Montalto 等[29]将前馈神经网络应到 GC 分析中，但其网络结构仍然相对简单。最近的研究中 Alex Tank 等[30]通过神经网络中隐藏层的参数来确定变量间的格兰杰因果关系，这种方法需要对神经网络参数施以较大的惩罚使得潜在无用的参数尽可能为 0，却导致网络训练时间过长，复杂度较高，现实意义欠佳。而且目前的研究还未将神经网络与动态研究格兰杰因果关系相结合。

3　问题定义

假设复杂动力系统中包含 n 个变量(X_1，X_2，…，X_n)，在包含 T 个观测点(1,2,…,T)的时间段内观测到该系统的动态变化过程，其第 i 个观测点和第 i+1 个观测点间的真实时间间隔可互不相同，与实际系统和时序数据有关。因此每个变量在 T 个观测点内都对应形成了一个时间序列，令 $X_{i,t}$ 表示第 i 个变量(时间序列)第 t 个观测点的值，且下文第 i 个变量可理解为第 i 个时间序列。

定义 1。系统所处状态和系统所累积的信息。对于某一个时刻 t，表示第 t 个观测点，系统所处的状态为$\boldsymbol{U}_t=(X_{1,t},X_{2,t},\cdots,X_{n,t})^{\mathrm{T}}\in\mathbb{R}^n$。系统所包含的所有信息 $(\boldsymbol{U}_1,\boldsymbol{U}_2,\cdots,\boldsymbol{U}_T)$ 构成复杂动力系统的多元时序数据，定义 $\mathcal{U}_t=(\boldsymbol{U}_{t-1},\boldsymbol{U}_{t-2},\cdots,\boldsymbol{U}_{t-k})\in\mathbb{R}^{n\times k}$ 表示 t 时刻之前系统所累积的信息，k 为模型阶数。

定义 2。最佳预测值。定义 $P(X_{j,t}\mid\mathcal{U}_t)$ 为使用系统 t 时刻之前系统所累积的信息$\mathcal{U}_t$进行预测而得到的 $X_{j,t}$ 的最佳预测值。$\mathcal{U}_t\setminus X_i$ 表示 t 时刻之前系统所累积的信息中去除第 i 个变量 X_i 的信息，$i\in(1,2,\cdots,n)$，$P(X_{j,t}\mid\mathcal{U}_t\setminus X_i)$ 为使用上述去

chinaXiv:202211.00126v1

除 X_i 后信息进行预测而得到 $X_{j,t}$ 最佳预测值。

定义 3。动态格兰杰因果关系。在格兰杰因果关系概念的基础上引入存在时间段，表示格兰杰因果关系在某个特定的时间段内存在。定义存在时间段 $\boldsymbol{ETP}=(t_{etp},t_{etp+1},\ldots,t_{etp+L-1})\subset(1,2,\cdots,T)$，其中 L 表示存在时间段的长度，相邻两个时间点 t_τ、$t_{\tau+1}(t_\tau,t_{\tau+1}\in \boldsymbol{ETP})$ 可不连续，即 $t_{\tau+1}-t_\tau\neq 1$ 成立，故存在时间段内的时间点可任意取自 T 个观测点，由时间序列中动态的时间点进而实现动态的因果分析。定义动态格兰杰因果关系的形式为(格兰杰因果关系, 存在时间段)，例如 $(X_i\rightarrow X_j,\boldsymbol{ETP})$. 基于格兰杰因果关系核心思想可预测性，在存在时间段 $\boldsymbol{ETP}$ 内，判断 X_j 对 X_i 具有格兰杰因果关系的方式是满足公式(1):

$$\operatorname{var}(X_{j,t}-P(X_{j,t}\mid\mathcal{U}_t))<\operatorname{var}(X_{j,t}-P(X_{j,t}\mid\mathcal{U}_t\setminus X_i))\tag{1}$$

其中 X_i 为目标变量，X_j 为源变量。动态格兰杰因果关系通过关联格兰杰因果关系与其存在时间段来实现动态因果分析。

本文所研究的问题是，从所有观测点中指定存在时间段 $\boldsymbol{ETP}$，分析复杂动力系统在此时间段中多元间的格兰杰因果关系状况。具体目标为分析系统中变量 X_i、X_j（i，$j\in n$）在 $\boldsymbol{ETP}$ 中，以其它变量为条件变量 $\{X_m\mid m\neq i,j\}$ 的情况下，是否存在格兰杰因果关系 $X_i\rightarrow X_j$ 或 $X_j\rightarrow X_i$ 或二者都存在。

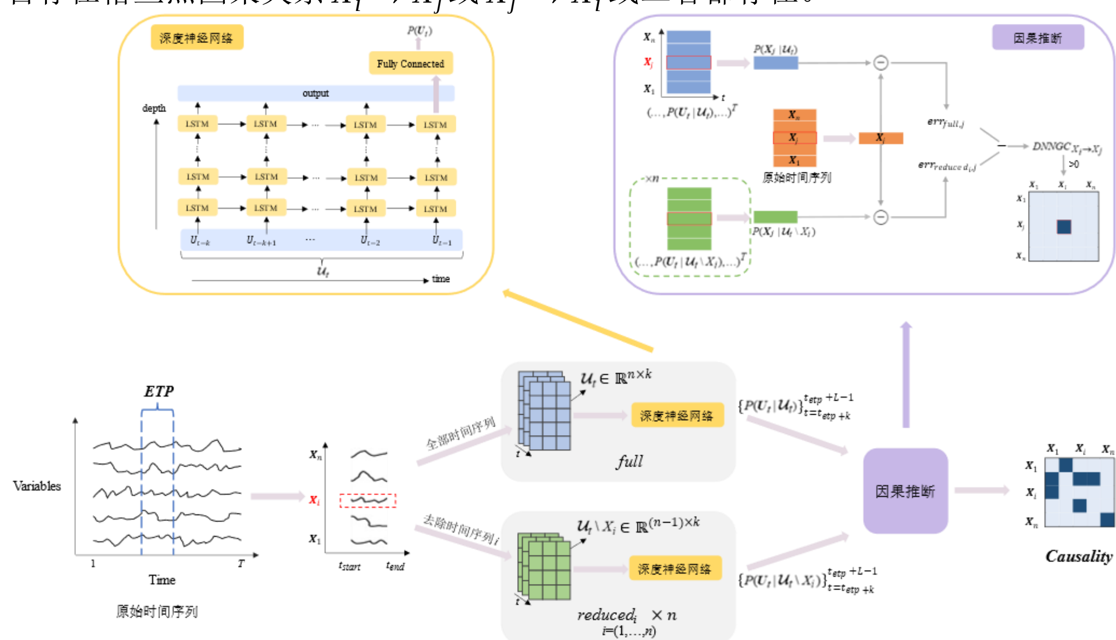


图 2 基于深度学习的动态格兰杰因果关系分析方法整体架构

本文提出的基于深度学习的动态格兰杰因果关系分析方法模型框架如图 2 所示，其显示了基于深度神经网络的格兰杰因果分析的一般过程。

4 适用于格兰杰因果分析的深度网络架构

假设复杂系统共有 n 个变量 $\{X_i\}_{i=1}^n$，在给定的 $t=(1,2,\ldots,T)$ 时间段内，X_j 为目标序列，X_i 为源序列，$\{X_m\}_{m\neq i,j}$ 为条件变量，则通常判断 X_i 对 X_j 是否有格兰杰因果关系而建立的模型为:

$$full: X_{j,t}=DNN\left(\mathrm{X}_{1,<t},\mathrm{X}_{2,<t},\ldots,\mathrm{X}_{i,<t},\ldots,\mathrm{X}_{n,<t}\right)+e_t^f\tag{2}$$

chinaXiv:202211.00126v1

$$reduced: X_{j,t} = DNN\left(X_{1,<t}, X_{2,<t}, \ldots, X_{n,<t}\right) + e_t^r \quad (3)$$

其中(3)去除了 X_i 的信息，DNN 代表深度神经网络，如 MLP、RNN，$X_{i,<t} = (X_{i,(t-1)}, X_{i,(t-2)}, \ldots, X_{i,(t-k)})$ 表示时间序列 i 的历史信息。通过比较 *full* 和 *reduced* 模型残差的方差进而判断 X_i 是否对 X_j 有格兰杰因果关系。

以上的通常方法判断 X_i 是否对 X_j 有格兰杰因果关系需要建立两个模型：*full* 和 *reduced*，而判断 X_j 对 X_i 又需要建立另外两个模型，在解决多元问题时需要建立 $2n^2$ 个模型，对现实多元系统来说复杂度较高。因此本文对格兰杰因果关系的预测结构改进，采用联合建模的方式来对一个变量所有可能格兰杰导致的变量进行分析，将模型数量降至 n+1，提出改进的用于格兰杰因果分析的深度神经网络架构，如图 2 所示。

t 时刻系统状态为 $\boldsymbol{U_t} = \left(X_{1,t}, X_{2,t}, \cdots, X_{n,t}\right)^{\mathrm{T}}$，则 t 时刻之前系统累积的信息为 $\mathcal{U}_t$ 如式(4)所示。此时不再如公式(2)(3)单独输入变量 X_i 的过去 $\mathrm{X}_{1,<t}$，而是将 t 时刻系统所处状态 $\boldsymbol{U}_t$ 作为一项滞后，整个模型的输入即为 $\mathcal{U}_t = \{\boldsymbol{U}_{\boldsymbol{\tau}}\}_{\tau=t-1}^{t-k}$，代表了整个系统的过去。而令 $\boldsymbol{U}_t \setminus X_i$ 表示 t 时刻系统去除 X_i 的信息后所包含的信息，用于判断源变量 X_i 是否对其它变量有格兰杰因果关系。同时输出也不再是仅仅对 t 时刻的 $X_{j,t}$ 进行预测，而是对 t 时刻整个系统的状态 $\boldsymbol{U}_t$ 进行预测。

$$\mathcal{U}_t = \begin{pmatrix} X_{1,t-1} & X_{1,t-2} & \cdots & X_{1,t-k} \\ X_{2,t-1} & X_{2,t-2} & \cdots & X_{2,t-k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ X_{n,t-1} & X_{n,t-2} & \cdots & X_{n,t-k} \end{pmatrix} \quad (4)$$

具体地对 *full* 和 *reduced*$_i$ 分别建立以下公式：

$$full: U_t = DNN\left(U_{t-1}, U_{t-2}, \cdots, U_{t-k}\right) + e_t^f \quad (5)$$

$$reduced_i: \boldsymbol{U}_t = DNN(\boldsymbol{U}_{t-1} \setminus X_i, \boldsymbol{U}_{t-2} \setminus X_i, \ldots, \boldsymbol{U}_{t-k} \setminus X_i) + e_t^r \quad (6)$$

其中 *full* 模型表示使用全部信息（系统 t 时刻之前累积的信息）进行状态预测，*reduced*$_i$ 模型表示使用系统去除变量 X_i 的信息进行预测。在图 2 的因果推断模块中，判断源变量 X_i 是否对目标变量 X_j 有格兰杰因果关系：分别从两个模型预测结果 $P\left(\boldsymbol{U}_t \mid \mathcal{U}_t\right)$ 和 $P(\boldsymbol{U}_t \mid \mathcal{U}_t \setminus X_i)$ 中取出的 X_j 最佳预测值 $P(X_{j,t} \mid \mathcal{U}_t)$ 和 $P(X_{j,t} \mid \mathcal{U}_t \setminus X_i)$，通过滑动窗口的形式得到系统从时刻 t_{etp+k} 至时刻 $t_{etp+L-1}$ 状态预测结果 $(P(\boldsymbol{U}_{t_{etp+k}}), P(\boldsymbol{U}_{t_{etp+k+1}}), \ldots, P(\boldsymbol{U}_{t_{etp+L-1}}))$，从中取出对应的 X_j 最佳预测值。所有的预测值构成预测序列 $P(\boldsymbol{X}_j \mid \mathcal{U}_t)$ 和 $P(\boldsymbol{X}_j \mid \mathcal{U}_t \setminus X_i)$，计算它们与真实时间序列 X_j 的误差的方差：

$$err_{full,j} = \mathrm{var}(\boldsymbol{X}_j \ominus P(\boldsymbol{X}_j \mid \mathcal{U}_t)) \quad (7)$$

$$err_{reduced_i,j} = \mathrm{var}(\boldsymbol{X}_j \ominus P(\boldsymbol{X}_j \mid \mathcal{U}_t \setminus X_i)) \quad (8)$$

其中 $\ominus$ 表示两个向量每个元素相减组成的新向量，将深度神经网络格兰杰因果关系(Deep Neural Network Granger Causality, DNNGC)定义为:

chinaXiv:202211.00126v1

$$DNNGC_{X_i \to X_j} = err_{full,j} - err_{reduced_i,j}, \begin{cases} > 0, X_i \to X_j \\ \leq 0, X_i \nrightarrow X_j \end{cases} \tag{9}$$

此时建立一个 $reduced_i$ 模型可判断 X_i 对系统中所有 n 个变量 $\{X_j\}_{j=1}^n$ 是否有格兰杰因果关系，通过改变 $reduced_i$ 模型来控制从 $\mathcal{U}_t$ 中去除的源变量。故 DNNGC 方法只需要建立 n+1 个模型：1 个共享的 *full* 模型和 n 个 $reduced_i$ 模型，即可确定系统中任意变量间的格兰杰因果关系且带有特定的方向。

根据公式(5)(6)，搭建适用于格兰杰因果分析的深度神经网络架构，如图 2 深度神经网络模块中搭建的 LSTM-FC 深度神经网络，选择循环神经网络 LSTM 作为主体模型，全连接(Fully Connected, FC)用于调整输出维度。该神经网络架构非常适合解决格兰杰因果关系问题，其一次数据训练的输入为$\mathcal{U}_t$，每个时间步(time step)的输入为某一时刻系统所处的状态，完美适应了格兰杰因果关系中的滞后并且不会打乱每个时刻系统所处的状态信息。

LSTM 的复杂参数更新方式允许其能与过去时刻的信息建立复杂的非线性依赖关系。LSTM 在 RNN 的基础上，引入了第二个隐藏状态变量$\boldsymbol{c}_t$，称为单元状态，其中包含了系统过去时刻的信息，并通过门控的方式更新参数和信息流动。具体更新公式如公式(10)所示，其中$\boldsymbol{i}_t, \boldsymbol{f}_t, \boldsymbol{o}_t$分别表示输入门、遗忘门和输出门，它们控制状态单元的每个组件$\boldsymbol{c}_t$的更新方式，然后转移到用于预测的隐藏状态$\boldsymbol{h}_t$。遗忘门$\boldsymbol{f}_t$控制过去单元状态影响未来单元状态的量，而输入门$\boldsymbol{i}_t$控制当前观测影响新单元状态的量。

$$\begin{aligned} i_t &= \sigma(W_{ii}x_t + b_{ii} + W_{hi}h_{t-1} + b_{hi}) \\ f_t &= \sigma(W_{if}x_t + b_{if} + W_{hf}h_{t-1} + b_{hf}) \\ o_t &= \sigma(W_{io}x_t + b_{io} + W_{ho}h_{t-1} + b_{ho}) \\ c_t &= f_t \otimes c_{t-1} + i_t \otimes \tanh(W_{ig}x_t + b_{ig} + W_{hg}h_{t-1} + b_{hg}) \\ h_t &= o_t \otimes \tanh(c_t) \end{aligned} \tag{10}$$

LSTM 在参数更新的同时对时间序列的长期依赖和复杂依赖形式建立关系。例如分析 t 时刻对过去的依赖情况，如果遗忘门接近于 1，t-1 时刻的信息会全部流入时刻 t，建立对 t-1 时刻的依赖。如果遗忘门一直保持 1，那么远在过去时刻的信息会持续传递直至流入 t 时刻，从而与远在过去的时刻建立依赖。而当需要跳过某一时刻时，调整参数使得该时刻的$\boldsymbol{c}_t$、$\boldsymbol{h}_t$的计算结果等于它上一时刻的$\boldsymbol{c}_t$、$\boldsymbol{h}_t$。在格兰杰因果关系的背景下，这种灵活的架构可以建模时间序列之间复杂的非线性依赖关系。

5 格兰杰因果关系推断

在实际实验研究时间序列 i 是否对时间序列 j 具有格兰杰因果关系时，当深度神经网络足够复杂以及训练时间充足时，去除某个源变量 X_i 后，尽管该源变量对目标变量 X_j 有格兰杰因果关系，但是最终并不会对 $reduced_i$ 模型的预测产生较大的影响。这是因为深度神经网络过拟合了数据，导致 *full* 模型和 $reduced_i$ 模

chinaXiv:202211.00126v1

型的预测效果相差不明显.这个现象在相对简单数据上的实验中尤其明显。解决过拟合主要有两种方式：减少参数的维数或者降低每个维度的有效规模[31]。参数空间的维数在本文问题中已经固定，故通过降低每个参数有效规模来解决过拟合，技术有正则化（regularization）、提早停止（early stopping）等。正则化引入了额外的控制神经网络参数惩罚程度的正则化参数 λ，然而对 λ 取值难以解释和把握，因为本文神经网络的目标是比较 *full* 模型和 $reduced_i$ 模型的预测效果哪一个更优，而 λ 的取值直接影响了最终的预测效果，但是在 λ 无穷个取值下难以确定最佳预测值，取值不同甚至可能推断出相反的结果，这使得正则化不适合在本文方法的背景下使用。提早停止则是在验证集上判断是否过拟合从而停止训练，而本文的问题背景下又不存在验证集，同样不适合。

为了放大 *full* 模型和 $reduced_i$ 模型预测效果的差距，本文从梯度下降的角度入手，在通过梯度下降更新神经网络参数的同时也反映了一个事实：如果时间序列 j 对 i 有因果关系，那么相比于未含有时间序列 j 信息的 $reduced_i$ 模型，含有 j 信息的 *full* 模型应该更容易拟合时间序列 i、在训练前期的预测效果更优。因此本文考虑整个神经网络训练过程中每完成一次训练后的预测误差，通过对比 *full* 模型和 $reduced_i$ 模型在训练前期中的预测效果来决定是否具有格兰杰因果关系。

具体地，在 *full* 和 $reduced_i$ 的每个模型训练中，每完成一次整个数据集前向传播和后向传播后(epoch)，计算预测结果与真实结果的残差方差 $error_{full,i,epoch}$ 和 $error_{reduced_i,j,epoch}$。将所有 epoch 中产生的残差方差组合成残差向量：$\boldsymbol{Error}_{full}=(err_{full,1},err_{full,2},\ldots,err_{full,N_{epoch}})\in\mathbb{R}^{N_{epoch}\times N}$ 和 $\boldsymbol{Error}_{reduced_i}=(err_{reduced_i,1},\ldots,err_{reduced_i,N_{epoch}})$，其中 i=1,2,…,n，N_{epoch} 表示模型的训练次数。判断源变量 X_i 是否对目标变量 X_j 有格兰杰因果关系的方法：当满足（1）对所有的 epoch，*full* 模型残差向量第 j 列比 $reduced_i$ 模型残差向量第 j 列小的次数多于 *full* 模型残差向量第 j 列比 $reduced_i$ 模型残差向量第 j 列大的次数，且(2)对每个 epoch，前 epoch 个训练内 *full* 模型残差向量的均值都小于 $reduced_i$ 模型，即满足公式(11)和(12):

$$\mathrm{NUM}(\boldsymbol{Error}_{full,:j}<\boldsymbol{Error}_{reduced_i,:j})>\mathrm{NUM}(\boldsymbol{Error}_{full,:j}>\boldsymbol{Error}_{reduced_i,:j})\quad(11)$$

$$\mathrm{MEAN}(\boldsymbol{Error}_{full,:j})<\mathrm{MEAN}(\boldsymbol{Error}_{reduced_i,:j})\quad(12)$$

NUM()表示满足某一条件的数量，其中:j 表示依次比较误差向量第 j 列中的每项误差；MEAN()以及:j 表示依次求第 j 列前 epoch 个残差方差的均值并比较，直至计算至第 j 列最后一项误差都满足小于则该条件才成立。最后统计检验确定显著性，如果时间序列 i 对 j 具有格兰杰因果关系，则将矩阵 $\boldsymbol{Causality}[j,i]$赋值为 1，否则赋值为 0。重复对所有时间序列 i、j 进行因果分析后，得到输出结果 $\boldsymbol{Causality}$。DNNGC 方法的伪码如算法 1 所示：

chinaXiv:202211.00126v1

算法 1 基于神经网络的多元格兰杰因果关系分析方法

输入: 多元时间序列数据$\boldsymbol{x_i(t)}$，$i=1,2,\cdots,N$ 代表时间序列变量的编号，$t=1,2,\cdots,N$ 表示时间序列长度，模型训练次数 N_{epoch}

输出: N 个时间序列间的格兰杰因果关系存在状况$\boldsymbol{Causality} \in \mathbb{R}^{N\times N}$

```
根据原始多元时间序列数据构建系统的状态矩阵 U_t，根据模型阶数 k，构建系统过去信息矩阵 𝓤_t = {U_t}_{τ=t-1}^{t-k}，初始化 Causality 每项为 0
根据公式 (3)(4) 建立 full 模型和对每个时间序列 i 建立 reduced_i 模型
for epoch in N_epoch do
    完成 full 模型一次整个数据集前向传播和后向传播
    预测系统状态 U_t，计算每个变量的预测结果与真实结果的残差方差 error_{full,j,epoch} 并添加至残差方差向量 Error_{full,j}
    for i in N do
        完成 reduced_i 模型一次整个数据集前向传播和后向传播
        预测系统状态 U_t，计算每个变量的预测结果与真实结果的残差方差 error_{reduced_i,j,epoch} 并添加至残差方差向量 Error_{reduced_i,j}
    end for
end for
for i in N do
    for j in N do
        if NUM(Error_{full,j} < Error_{reduced_i,j}) > NUM(Error_{full,j} > Error_{reduced_i,j}) and MEAN(Error_{full,j,epoch}) < MEAN(Error_{reduced_i,j,epoch}) then
            统计检验证明显著性，时间序列 i 导致 j，Causality[j,i] = 1
        end if
    end for
end for
```

6 实验结果与分析

本文在模拟实验中充分验证 DNNGC 的有效性和性能，在真实的人体睡眠数据中探索深睡和浅睡期间人体生理网络的动态格兰杰因果关系。

6.1 模拟实验

根据格兰杰因果关系存在形式的复杂度，考虑三种典型的格兰杰因果关系存在形式：链状、树状、环状，并探索在每一种格兰杰因果关系存在形式下，格兰杰因果关系的长度对本文方法的性能影响。总的来说，实验结果表明本文的方法可以准确地发现以上三种典型格兰杰因果关系存在形式的系统（多元时间序列）中潜在的格兰杰因果关系状况。

本文使用的模拟数据是由 Lorenz-96[32]模型生成的连续非线性数据，p 维 Lorenz-96 是一种强非线性模型，由如下的一系列微分方程给出：

$$\frac{dx_{t,i}}{dt}=\left(x_{t,i+1}-x_{t,i-2}\right)x_{t,i-1}-x_{t,i}+F \tag{13}$$

其中 $\boldsymbol{x}_{t(-1)}=\boldsymbol{x}_{t(p-1)}$，$\boldsymbol{x}_{t0}=\boldsymbol{x}_{tp}$,$\boldsymbol{x}_{t(p+1)}=\boldsymbol{x}_{t1}$，$F$ 为决定非线性和混沌程度的强迫参数，

chinaXiv:202211.00126v1

chinaXiv:202211.00126v1

i=1,2,…,p，含有 n 个时间序列的系统具有 n^2 个格兰杰因果关系存在情况。一个好的因果发现方法需要尽可能多地发现真实存在的因果关系，并控制假阳性的数量[5]，因此选择准确率(Accuracy)作为评价指标，可直观地体现本文方法尽可能多地发现真实的因果关系存在情况(true positives、true negatives)的同时又能控制推断错误的因果关系的数量(false positives、false negatives)，计算方式为

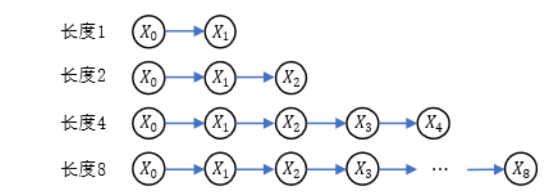
$$Accuracy=\frac{TP+TN}{TP+FP+TN+FN} \tag{14}$$

其中 TP 表示真阳性，TN 真阴性，FP 假阳性，FN 假阴性.

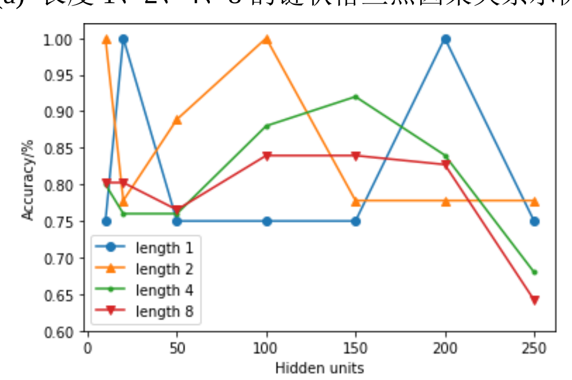
（1）链状格兰杰因果关系

链状格兰杰因果关系的特点是对于一个时间序列，其只能导致一个时间序列或者被另一个时间序列导致。实验数据的结构如图 3(a)所示，蓝色线表示格兰杰因果关系，不画线则代表没有因果关系，对 *full* 和 $reduced_i$ 模型设定相同的神经网络参数，分别对图 3(a)中长度 1、2、4、8 的多元时间序列以及不同隐藏单元数量进行实验，实验结果如图 3(b)所示。

结果表明长度为 1 和 2 的因果关系发现的准确率多次达到 100%，最低准确率超过 75%，长度为 4 和 8 的准确率平均分别在 85%和 80%左右。在隐藏单元数量取值的两端一般准确率取最小值，原因是隐藏单元太少导致模型不能很好地模型其中的非线性关系；太多则导致模型过拟合，对数据充分拟合而不能区分 *full* 和 *reduced* 模型之间的误差差距，使得模型准确率降低。



(a) 长度 1、2、4、8 的链状格兰杰因果关系示例



(b) 长度 1、2、4、8 的链状格兰杰因果关系的因果发现准确率

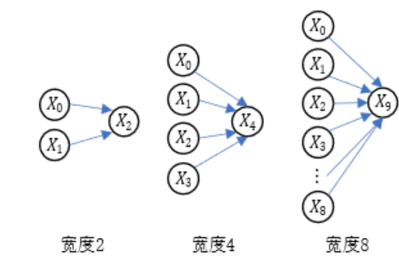
图 3 链状格兰杰因果关系分析实验

（2）树状格兰杰因果关系

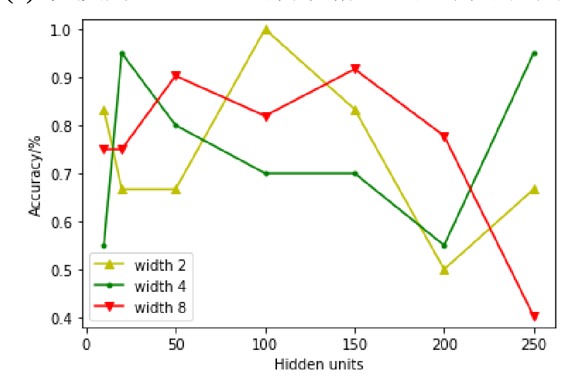
树状格兰杰因果关系的特点是对于一个时间序列，其只能导致一个时间序列，但可以被其它任何时间序列所导致。同样进行与 5.1.1 设定相同的实验分析。

实验结果如图 4 所示，其中宽度为 2 的因果关系发现的准确率达到 100%，宽度 4 和 8 的准确率最高分别达到 95%和 92%。但对隐藏单元数量较为敏感，

准确率波动幅度较大，同样准确率最低在隐藏单元数量两端数量取值的两端发生。



(a) 宽度为 2、4、8 的树状格兰杰因果关系示例

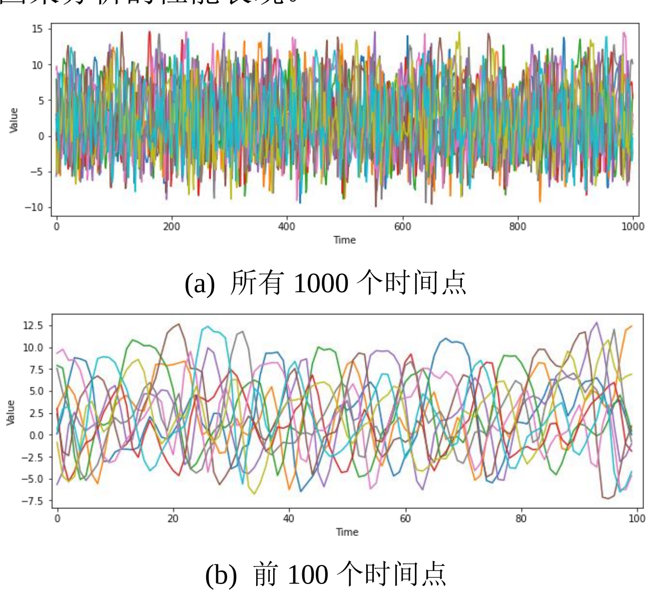


(b) 宽度 2、4、8 的树状格兰杰因果关系的因果发现准确率

图 4 树状格兰杰因果关系分析实验

（3）链状格兰杰因果关系

环状格兰杰因果关系较为复杂，其包含着链状和树状关系的存在形式，多元时间序列之间的格兰杰因果关系呈现环状的形式，每个时间序列都可导致任何序列或被任何序列导致，如图 6(c)所示。设定 Lorenz-96 中 p=10，F=10，采样率 $\Delta t = 0.1$，生成含有 10 个变量、每个变量连续 1000 个时间点的非线性数据，生成的多元时间序列如图 5 所示，其真实的格兰杰因果关系存在情况如图 6(a)、6(c)所示。本文以该复杂多元时序数据为代表，展现本文方法在复杂的非线性多元时序数据上格兰杰因果分析的性能表现。



(a) 所有 1000 个时间点

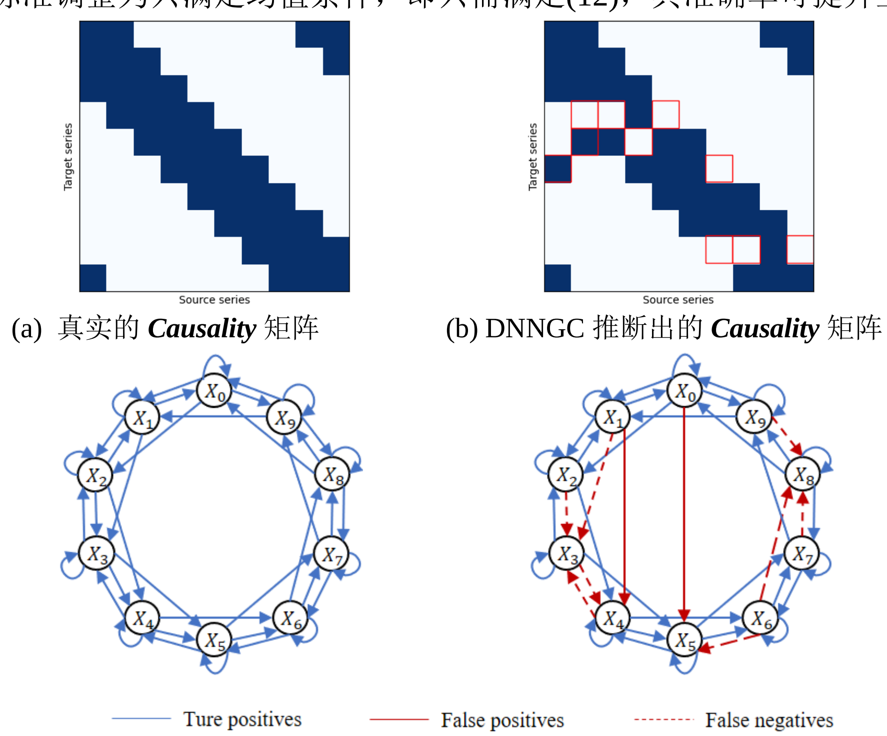
(b) 前 100 个时间点

图 5 具有环状格兰杰因果关系的多元时间序列样例

chinaXiv:202211.00126v1

chinaXiv:202211.00126v1

实验设定深度神经网络层数为 2，每层隐藏单元数量为 256，学习率 0.01，模型滞后（阶数）k=10，N_{epoch}=200。当深度神经网络训练到 300 次时，此时网络趋于收敛，取前 300 次训练参与评判，采用 4.3 中的评判标准来判断变量间是否存在格兰杰因果关系。实验直接输出结果为 $\boldsymbol{Causality} \in \mathbb{R}^{10\times10}$，如图 6(b)所示，其中红色框表示判断错误，蓝色块(i, j)表示 $X_j \rightarrow X_i$，白色块表示 $X_j \nrightarrow X_i$，将 ***Causality*** 可视化为图 6(d)所示。实验结果表明准确率达到了 90.0%，并且如果仅将判断标准调整为只满足均值条件，即只需满足(12)，其准确率可提升至 94%。



(a) 真实的 ***Causality*** 矩阵　　(b) DNNGC 推断出的 ***Causality*** 矩阵

(c) 真实格兰杰因果关系的可视化　　(d) DNNGC 推断出的格兰杰因果关系的可视化

图 6 环状格兰杰因果关系的实验结果

6. 2　睡眠生理分析

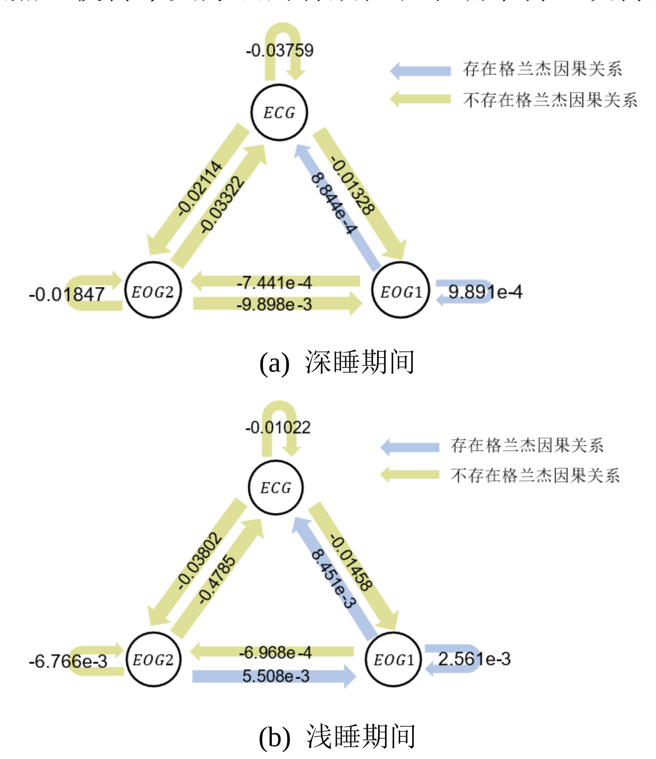
人体生理系统具有多元、复杂非线性、动态变化的特点，作为现实世界复杂动力系统的典型场景，将本文的方法应用到人体睡眠期间生理系统因果关系的发现中，分析本文的方法应对现实复杂动力系统的表现，并且所发现的因果具有潜在现实意义。

生理学家已发现浅睡期间存在眼电和心电的稳定交互，而在深睡期间则不存在该稳定交互[7]。本文实验首先对该结论进行因果关系层面的验证，然后分析该交互在整个睡眠期间的因果变化，最后在深睡和浅睡期间发现人体各生理系统间的因果状况。

实验数据来自 ISRUC-SLEEP Dataset[33]公开数据集，从 2009-2013 年间科英布拉大学（CHUC）医院睡眠医学中心获得来自 118 为受试者持续约 8 小时的整晚多导睡眠图(Polysomnography, PSG)数据，采样率 200hz，包括 6 个脑电(EEG)、2 个眼电(EOG)、1 个心电(ECG)、1 个下巴肌电(CHIN EMG)、1 个腿部肌电(LEG EMG)共 11 个通道采集的信号，每个通道的大致放置位置如图 9 所示，数据样例

如图 1(a)所示。

首先单独分析深睡和浅睡期间的眼电和心电之间的格兰杰因果关系，并将此作为评估本文方法的一项标准。以公式(9)中的 DNNGC 指标为评判标准，其值大于 0 表示存在从源变量到目标变量的格兰杰因果关系，值越大表示关系约强烈，值小于或等于 0 表明不存在该项因果关系。实验建立在 118 位受试者的全部睡眠数据上，神经网络层数为 2，每层隐藏单元数量为 6000，batch 大小设定为 128。实验结果如图 7 所示，其中 EOG1 表示左眼眼动信号，EOG2 表示右眼眼动信号，ECG 表示心电信号，蓝色线表示存在从源生理系统指向目标生理系统的因果关系，绿色表示不存在该因果关系，权值为 DNNGC。结果表明深睡和浅睡期间眼电和心电间均存在一条 $EOG1 \rightarrow ECG$ 的因果关系，但浅睡的误差改进是深睡的 10 倍，意味着该因果关系的强度在浅睡中要远大于深睡期间，在浅睡中更加稳固和强烈，使得本文方法的有效性和准确率再一次得到印证。



(a) 深睡期间

(b) 浅睡期间

图 7 深睡和浅睡期间眼电和心电的格兰杰因果关系

针对一位受试者整晚睡眠的多元信号，以每 30s 为时间段，分析整晚睡眠分期中格兰杰因果关系 $EOG \rightarrow ECG$ 的存在状况，实验结果如图 8 所示。其中蓝线标记受试者的睡眠阶段，黑线表示 DNNGC。实验发现浅睡中 55.1%的时间段是存在 $EOG \rightarrow ECG$ 的，而在深睡中只有 28.4%的时间段存在。并且该结果还表明在 0.5-2.5h 以及 4.5-7h 间，受试者处于 non-REM 期间，$EOG \rightarrow ECG$ 具有连续保持性，通常伴随着深睡和浅睡的转变在存在与不存在间变化；而在 0-0.5h 和 2.5-4.5h 内，受试者处于 Wake 期间，该因果关系变化剧烈而频繁，表明受试者处于一个比较混乱的阶段。

chinaXiv:202211.00126v1

chinaXiv:202211.00126v1

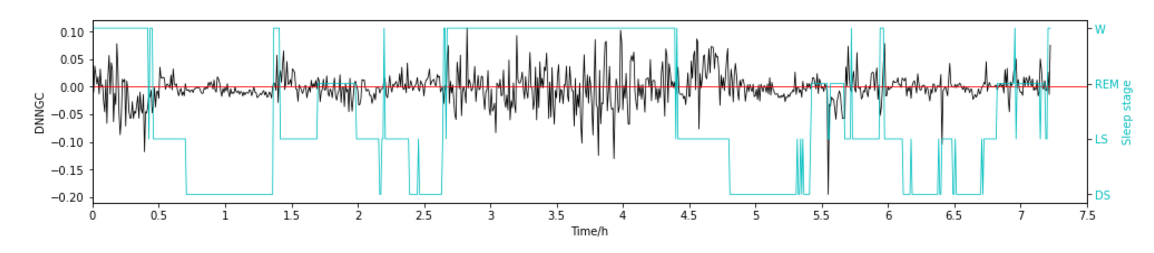
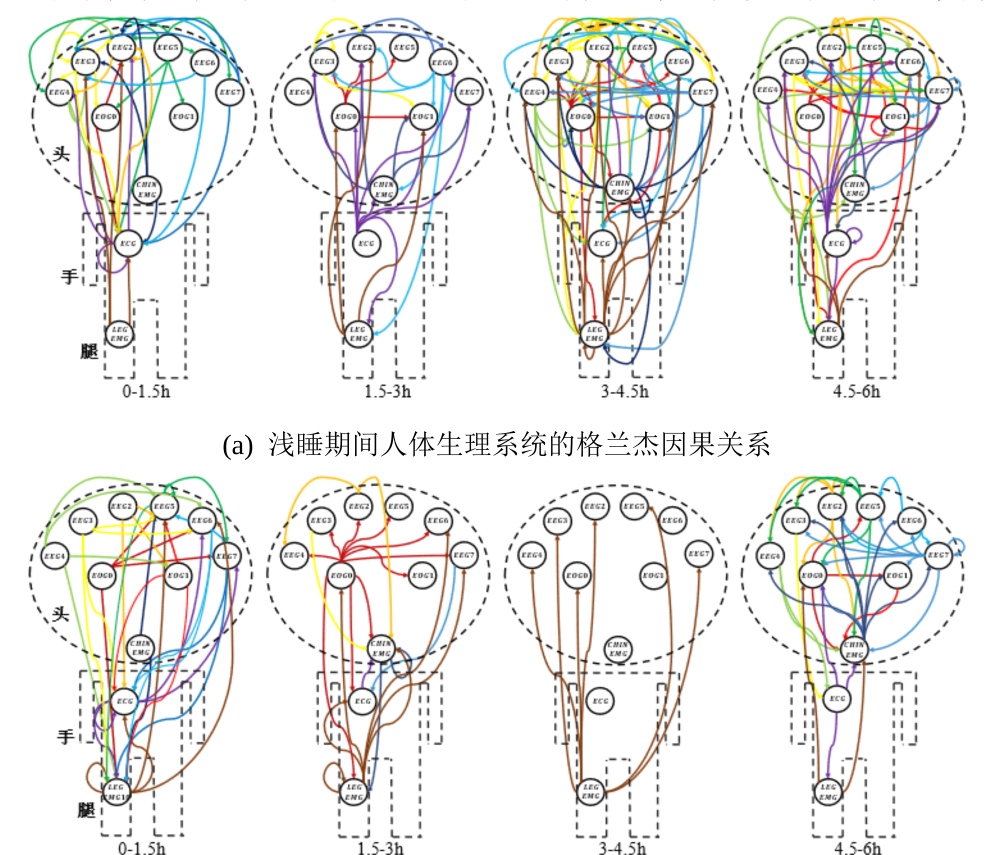


图 8 一位受试者整晚睡眠分期的动态格兰杰因果关系

最后整合 188 位受试者的睡眠数据，以每个睡眠周期 1.5h[34]为时间间隔，筛选其中的深睡和浅睡阶段，分别分析人体各生理系统间的因果关系情况。图 9 的实验结果发现浅睡期间人体生理系统的因果关系数量更多、交互更加复杂。



(a) 浅睡期间人体生理系统的格兰杰因果关系

(b) 深睡期间人体生理系统的格兰杰因果关系

图 9 整晚睡眠中每 1.5h 内的深睡和浅睡期间各生理系统格兰杰因果关系

7 结论

本文弥补了现有格兰杰因果关系分析方法的缺点，提出一种基于深度学习的动态格兰杰因果关系分析方法及适用的神经网络架构，在将格兰杰因果关系分析与深度学习技术结合的同时，解决了模型空间复杂度高、复杂非线性关系建模等问题。在 Lorenz-96 模拟数据上对三种典型格兰杰因果关系存在形式进行的实验，证明了本文方法的有效性和准确率；在真实人体睡眠期间生理系统的多元时间序列上的实验结果也印证了生理学家的研究，通过分析一位受试者整晚睡眠分期的格兰杰因果关系，探索了整晚睡眠中人体各生理系统间的动态格兰杰因果关系，具有潜在医学价值。

未来的研究工作将本文方法拓展应用至时间序列聚类[35-36]、时间序列异常检测[37]等下游任务中，在探索本文方法的具体应用场景的同时进一步完善本文方法。

参考文献：

[1] Gao Tengfei, Liu Yongyan, Tang Yunbo, et al. A massively parallel bayesian approach to factorization-based analysis of big time series data[J]. Journal of Computer Research and Development, 2019, 56(7): 1567-1577. (高腾飞, 刘勇琰, 汤云波, 等. 面向时间序列大数据海量并行贝叶斯因子化分析方法[J]. 计算机研究与发展, 2019, 56(7): 1567-1577.)

[2] Stam C J, van Straaten E C. Go with the flow: use of a directed phase lag index (dPLI) to characterize patterns of phase relations in a large-scale model of brain dynamics[J]. Neuroimage, 2012, 62(3): 1415-1428.

[3] Sheikhattar A, Miran S, Liu Ji, et al. Extracting neuronal functional network dynamics via adaptive granger causality analysis[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2018, 115(17): E3869-E3878.

[4] Sameshima K, Baccala L A. Brain connectivity: an overview[M]//Methods in brain connectivity inference through multivariate time series analysis. USA: CRC Press, 2014: 1-9.

[5] Li Yan, Wang Ting, Liu Wanwei, et al. ICIC_Target: a novel discovery algorithm for local causality network of target variable[J]. Journal of Computer Research and Development, 2016, 53(7): 1544-1560. (李岩, 王挺, 刘万伟, 等. ICIC_Target：目标节点的局部因果关系网络的发现算法[J]. 计算机研究与发展, 2016, 53(7): 1544-1560.)

[6] Runge J, Nowack P, Kretschmer M, et al. Detecting and quantifying causal associations in large nonlinear time series datasets[J]. Science Advances, 2019, 5(11): eaau4996

[7] Bashan A, Bartsch R, Kantelhardt J W, et al. Network physiology reveals relations between network topology and physiological function[J]. Nature Communications, 2012, 3, 702

[8] Granger C W J. Investigating causal relations by econometric models and cross-spectral methods[J]. Econometrica, 1969, 37(3): 424-438.

[9] Chiou-Wei S Z, Chen C F, Zhu Zhen. Economic growth and energy consumption revisited—evidence from linear and nonlinear granger causality[J]. Energy Economics, 2008, 30(6): 3063 – 3076

[10] Hong Yongmiao, Liu Yanhui, Wang Shouyang. Granger causality in risk and detection of extreme risk spillover between financial markets[J]. Journal of Econometrics, 2009, 150(2): 271 – 287.

[11] Seth A K, Barrett A B, Barnett L. Granger causality analysis in neuroscience and neuroimaging[J]. Journal of Neuroscience, 2015, 35(8): 3293-3297.

[12] Friston K J. Functional and effective connectivity in neuroimaging: A synthesis[J]. Human Brain Mapping, 1996, 2(1-2): 56-78.

[13] Dhamala M, Rangarajan G, Ding M. Analyzing information flow in brain networks with nonparametric granger causality[J]. Neuroimage, 2008, 41(2): 354-362.

[14] Chén O Y, Cao Hengyi, Reinen J M, et al. Resting-state brain information flow predicts cognitive flexibility in humans[J]. Scientific Report, 2019, 9, 3879.

[15] Hochreiter S, Schmidhuber J. Long short-term memory[J]. Neural Computation, 1997, 9 (8): 1735 – 1780.

[16] Graves A. Supervised sequence labelling[M]//Supervised sequence labelling with recurrent neural networks. Berlin: Springer, 2012: 5-13.

chinaXiv:202211.00126v1

[17] Xu Jinghang, Zuo Wanli, Liang Shining, Wang Ying. Causal relation extraction based on graph attention networks[J]. Journal of Computer Research and Development, 2020, 57(1): 159-174. (许晶航, 左万利, 梁世宁, 王英. 基于图注意力网络的因果关系抽取[J]. 计算机研究与发展, 2020, 57(1): 159-174.)
[18] Sun Chenxi, Hong Shenda, Wang Jingyu, et al. A systematic review of deep learning methods for modeling electrocardiograms during sleep[J]. Physiological Measurement, 2022, 43(8): 08TR02.
[19] Spadon G, Hong Shenda, Brandoli B, et al. Pay attention to evolution: time series forecasting with deep graph-evolution Learning[J]. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2022, 44(9): 5368-5384.
[20] Yang Ling, Hong Shenda. Unsupervised time-series representation learning with iterative bilinear temporal-spectral fusion[C]//Proceedings of the 39th International Conference on Machine Learning. New York: ACM, 2022: 25038-25054.
[21] Wiener N. The theory of prediction[M]//Modern Mathematics for the Engineer: First Series. USA: Dover Publications, 1956: 165-190.
[22] Ren Weijie, Han Min. Survey on causality analysis of multivariate time series[J]. Acta Automatica Sinica, 2021, 47(1): 64-78. (任伟杰, 韩敏. 多元时间序列因果关系分析研究综述[J]. 自动化学报, 2021, 47(1): 64-78.)
[23] Geweke J F. Measures of conditional linear dependence and feedback between time series[J]. Journal of the American Statistical Association, 1984, 79(388): 907-915.
[24] Arnold A, Liu Yan, Abe N. Temporal causal modeling with graphical granger methods[C]//Proceedings of the 13th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, New York: ACM, 2007: 66-75.
[25] Yang Guanxue, Wang Lin, Wang Xiaofan. Reconstruction of complex directional networks with group lasso nonlinear conditional granger causality[J]. Scientific Reports, 2017, 7(1): 2991.
[26] Ancona N, Marinazzo D, Stramaglia S. Radial basis function approach to nonlinear granger causality of time series[J]. Physical Review E, 2004, 70(5): 056221.
[27] Marinazzo D, Pellicoro M, Stramaglia S. Kernel-granger causality and the analysis of dynamical networks[J]. Physical Review E, 2008, 77(5): 056215.
[28] Attanasio A, Triacca U. Detecting human influence on climate using neural networks based granger causality[J]. Theoretical and Applied Climatology, 2011, 103(1-2): 103-107.
[29] Montalto A, Stramaglia S, Faes L, et al. Neural networks with non-uniform embedding and explicit validation phase to assess granger causality[J]. Neural Networks, 2015, 71:159-171.
[30] Tank A, Covert I, Foti N, et al. Neural granger causality[J]. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2022, 44(8): 4267-4279.
[31] Lutz P. Early stopping - but when?[M]//Neural Networks: Tricks of the Trade. Berlin: Springer, 2012: 53-67.
[32] Lorenz E N, Emanuel K A. Optimal Sites for supplementary weather observations simulation with a small model [J]. Journal of American Meteorological Society, 1998, 55(3): 399-414.
[33] Sirvan K, Sousa T, Santos J M, et al. ISRUC-Sleep: a comprehensive public dataset for sleep researchers[J]. Computer Methods and Programs in Biomedicine, 2016, 124: 180-192.
[34] Carskadon M A, Dement W C. Normal human sleep: an overview[M]//Principles and Practice of Sleep Medicine. St. Louis: Elsevier Saunders, 2011: 16-26.
[35] Du Guowang, Zhou Lihua, Yang yudi, et al. Deep multiple auto-encoder-based multi-view clustering[J]. Data Science and Engineering, 2021, 6:323-338.
chinaXiv:202211.00126v1

[36] Xu Chenxiao, Hao Huang, Yoo S. A deep neural network for multivariate time series clustering with result interpretation[C]//Proceedings of 2021 International Joint Conference on Neural Networks, Piscataway: IEEE, 2021: 1-8.
[37] Huang Xunhua, Zhang Fengbin, Fan Haoyi, Xi Liang. Multimodal adversarial learning based unsupervised time series anomaly detection[J]. Journal of Computer Research and Development, 2021, 58(8): 1655-1667. (黄训华, 张凤斌, 樊好义, 等. 基于多模态对抗学习的无监督时间序列异常检测[J]. 计算机研究与发展, 2021, 58(8): 1655-1667.)

(通讯作者: 李红燕 E-mail:leehy@pku.edu.cn)

作者贡献声明：

刘博：提出算法思路，设计并完成实验，撰写论文；
李红燕：提出论文整体指导性建议，指导并修改论文；
洪申达：提出研究选题，指导实验设计与数据分析，指导并修改论文。

chinaXiv:202211.00126v1